

## 29-0065 W20-11

オキサゾリン環修飾によるアシジアサイクラマイド誘導体の新規コンフォメーション

○浅野 晶子<sup>1</sup>, 土井 光暢<sup>1</sup> (<sup>1</sup>大阪薬大)

[目的・方法]アシジアサイクラマイド(ASC)は分子内にチアゾール環(Thz)、オキサゾリン環(Oxz)を含み、分子内二回回転対称を有するcyclo(-D-Val-Thz-L-Ile-L-Oxz-)<sub>2</sub>という配列をもつ、抗腫瘍活性ペプチドである。我々は様々なASC誘導体を合成し、構造解析を行った結果、主に“folded”と“square”型の2種類のコンフォメーションを明らかにしてきた。今回は2カ所に存在するL-Oxz環の一方をD-Oxz環、もう一方をD-*allo*-Thr残基に置換することによってOxz環の立体配置と数を修飾した、cyclo(-D-Val-Thz-L-Ile-**D-Oxz**-D-Val-Thz-L-Ile-**D-*allo*-Thr**-)という配列の誘導体を合成し、X線構造解析を行った。

[結果]構造解析の結果、この新規誘導体は“folded”型に分類されるコンフォメーションをとっていた。しかし、従来の“folded”型コンフォメーションにおけるOxz環の酸素原子はペプチド環の内側を向いていたのに対し、外側を向いているという点が異なっており、Oxz環の向きが反転した新規の“folded”型コンフォメーションが得られた。